



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
PROGRAMA DE  
MAESTRIA Y DOCTORADO EN CIENCIAS QUIMICAS



Programa de actividad académica

<b>Denominación: Determinación estructural por Difracción de rayos X</b>				
<b>Clave:</b>	<b>Semestre:</b>	<b>Campo de conocimiento: Química</b>		<b>No. Créditos: 6</b>
<b>Carácter: Optativa de elección</b>		<b>Horas por semana</b>	<b>Total horas/ semana</b>	<b>Total horas/ semestre</b>
<b>Tipo: Teórico</b>		<b>Teoría:</b>	<b>Práctica:</b>	
		3	0	
<b>Modalidad: CURSO</b>		<b>Duración del programa: 16 semanas</b>		

<b>Actividad académica con seriación antecedente: ninguno</b>
<b>Objetivo general:</b> Los alumnos aprenderán simetría cristalográfica, la teoría de difracción de rayos X y básicos de la interpretación de los resultados obtenidos por esta técnica.
<b>Objetivos específicos:</b>
Aprender elementos de simetría, y la secuencia celda unitaria, sistema cristalino, redes de Bravais
Comprender simetría cristalográfica y poder construir diagrama de grupo espacial
Comprender a la Ley de Bragg, índices de Miller, espacio recíproco y ausencias sistemáticas y poder a través de su análisis determinar el grupo espacial
Aprender el significado de Factor de estructura y los fundamentos físicos que lo afectan
Conocer métodos de resolución del problema de fase y del refinamiento de la estructura
Familiarizarse con la interpretación de los resultados y con la base de estructuras cristalinas CSD (la UNAM cuenta con licencia para toda la Universidad)

<b>Índice temático</b>			
<b>Unidad</b>	<b>Tema</b>	<b>Horas</b>	
		<b>Teóricas</b>	<b>Prácticas</b>
1	Definición de monocristal y elementos de simetría	3	
2	Simetría cristalográfica, grupos espaciales y sus diagramas	15	
3	Índices de Miller, Ley de Bragg y espacio recíproco	9	
4	Factores de estructura	6	
5	Métodos de resolución y refinamiento de estructuras cristalinas	9	
6	Métodos de visualización de las estructuras	1.5	
7	Archivo CIF, tablas cristalográficas y su interpretación	1.5	
8	Base de datos de estructuras cristalinas de Cambridge (CSD)	1.5	
9	Preparación de los resultados par apublicación	1.5	
<b>Total de horas teóricas:</b>		<b>48</b>	
<b>Total de horas prácticas:</b>		<b>0</b>	
<b>Suma total de horas:</b>		<b>48</b>	

<b>Bibliografía básica actualizada:</b>
1) International Tables for Crystallography Volume A: Space-group symmetry Second online edition (2016) ISBN: 978-0-470-97423-0
2) Crystal Structure Determination, Werner Massa, ISBN 978-3-662-06431-3
3) Fundamentals of Crystallography (International Union of Crystallography Monographs on Crystallography) 3rd Edition, by Carmelo Giacovazzo et al., ISBN-10: 0199573662
<b>Bibliografía complementaria:</b>

<b>Sugerencias didácticas:</b>		<b>Mecanismos de evaluación del aprendizaje de los alumnos:</b>	
Exposición oral	<input checked="" type="checkbox"/>	Exámenes parciales	<input type="checkbox"/>
Exposición audiovisual	<input checked="" type="checkbox"/>	Examen final escrito	<input checked="" type="checkbox"/>
Ejercicios dentro de clase	<input checked="" type="checkbox"/>	Trabajos y tareas fuera del aula	<input checked="" type="checkbox"/>
Ejercicios fuera del aula	<input checked="" type="checkbox"/>	Exposición de seminarios por los alumnos	<input checked="" type="checkbox"/>
Seminarios	<input type="checkbox"/>	Participación en clase	<input checked="" type="checkbox"/>
Lecturas obligatorias	<input checked="" type="checkbox"/>	Asistencia	<input checked="" type="checkbox"/>
Trabajo de investigación	<input type="checkbox"/>	Seminario	<input type="checkbox"/>
Prácticas de taller o laboratorio	<input type="checkbox"/>	Otras:	<input type="checkbox"/>
Prácticas de campo	<input type="checkbox"/>		
Otras: _____	<input type="checkbox"/>		